

Jürgen Troe

## Nachruf auf Peter Botschwina

04. Mai 1948 – 27. Dezember 2014

Am 27. Dezember 2014 ist Peter Botschwina, Ordentliches Mitglied der Mathematisch-Physikalischen Klasse der Akademie seit 2001, im Alter von nur 66 Jahren nach schwerer Krankheit in Göttingen verstorben. Er war ordentlicher Professor für Theoretische Chemie am Institut für Physikalische Chemie der Universität Göttingen. Sein Tod hat die Fakultät für Chemie und seine Fachkollegen in aller Welt tief erschüttert. Mit seinem Tod ist eine bemerkenswerte Ära der Theoretischen Chemie am Göttinger Institut zu Ende gegangen, und die Zukunft dieses wichtigen Teilgebietes der Chemie in Göttingen ist alles andere als gesichert.

Peter Botschwinas Wirken zu würdigen heißt zugleich, die Geschichte der Theoretischen Chemie in Göttingen nachzuzeichnen. Dazu muss man weit ausholen. Wilhelm Jost, Mitglied und Namensgeber der Wilhelm-Jost-Vorlesung unserer Akademie, hatte sich 1929 an der Technischen Universität Hannover habilitiert. Dort befreundete er sich mit Hans Hellmann, der als Assistent am Institut für Theoretische Physik arbeitete. Jost und Hellmann waren ohne Zweifel kongenial. In einer gemeinsamen Arbeit (H. Hellmann und W. Jost, „Zum Verständnis der ‚chemischen Kräfte‘ nach der Quantenmechanik“, Zeitschrift für Elektrochemie 40, 806 (1934)) bemühten sie sich um eine für die Chemie verständliche Erklärung der chemischen Bindung, und sie planten auch, ein gemeinsames Buch über die Quantenchemie zu verfassen. Dann aber nahm das Verhängnis seinen Lauf. Hellmann war mit einer Jüdin verheiratet. Darauf wurde ihm die Habilitation verweigert, und er wurde aus seiner Stelle entlassen. Hellmann nahm daraufhin das Angebot einer Professur am Karpov-Institut in Moskau an und emigrierte 1934. Hier schrieb er nun allein das erste Lehrbuch der Quantenchemie überhaupt, zunächst in russischer Sprache, aber bald wurde das Buch auch ins Deutsche übertragen. Hellmann ist den theoretischen Physikern auch über das Hellmann-Feynman-Theorem der Quantenmechanik bekannt, das er 1933 noch in Hannover publizierte. Dieses Theorem wurde später noch einmal von Feynman entdeckt, der Hellmanns Arbeiten nicht kannte. Deshalb ist es heute gemeinsam nach Hellmann und Feynman benannt. Hellmanns Zeit in Moskau währte nicht lange. Er wurde 1938 als angeblicher deutscher Spion verhaftet und in der zweiten Stalinschen Säuberungswelle „liquidiert“. Damit endeten auch Wilhelm Josts Pläne zu einer weiteren Zusammenarbeit mit Hellmann, aber Josts Affinität zur Quantenchemie blieb bestehen. Als Jost nach Stationen in Leipzig, Marburg und Darmstadt 1953 schließlich nach

Göttingen berufen wurde, bemühte er sich zäh um die Schaffung einer Professur für Theoretische Chemie. 1964 gelang dieses Vorhaben dann endlich. Damit war die erste Professur für Theoretische Chemie in Deutschland überhaupt geschaffen, und dies ist die Professur, die Peter Botschwina 30 Jahre später übernahm.

Als Erstem wurde die Göttinger Professur für Theoretische Chemie Werner A. Bingel, einem Hückel-Schüler, übertragen. Hückel ist über die Debye-Hückel-Theorie der Elektrolyte sowie über das H in der HMO-Methode, der Hückel-Molekül-Orbitalmethode, den Chemikern wohlbekannt. Bingel war zunächst an der damaligen Forschungsstelle für Spektroskopie der Max-Planck-Gesellschaft in Hechingen tätig. Es sei erwähnt, dass diese Forschungsstelle später als Max-Planck-Institut für Spektroskopie nach Göttingen übersiedelte und schließlich im Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie aufging. Bingel ging dann an das Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik in München. Zu dieser Zeit begann die Molekülspektroskopie für die Astrophysik immer wichtiger zu werden, denn über die Spektralanalyse des von den Astronomen aufgenommenen Lichtes kann man tiefe Einblicke in astrophysikalische und astrochemische Vorgänge erhalten. Es zeichnete sich ab, dass die numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung zu einer immer besseren Deutung der Molekülspektren führen würde. Dieses half der Theoretischen Chemie, begabte junge Physiker und Chemiker an sich zu ziehen. So wurde auch in Göttingen eine stattliche Reihe junger Wissenschaftler ausgebildet, die dann für die Besetzung der neu geschaffenen Lehrstühle für Theoretische Chemie zur Verfügung standen. Als Erster kam Werner Kutzelnigg nach Göttingen, habilitierte sich hier und ging über Karlsruhe schließlich nach Bochum. Ebenso fand Volker Staemmler seinen Weg nach Bochum. Auch Reinhart Ahlrichs wurde hier promoviert. Später übernahm dieser den Lehrstuhl für Theoretische Chemie an der Technischen Universität Karlsruhe. Damals begann die große Zeit der Methodenentwicklung in der Quantenchemie. Eigentlich war seit der Formulierung der Schrödinger-Gleichung in den 1920er Jahren die Chemie zu einem Untergebiet der Physik geworden, aber in der Praxis sah dies anders aus. Je mehr Elektronen und Atomkerne ein molekulares System besitzt – und das betrifft nun gerade die Chemie –, desto schwieriger wird die numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung. Selbst die gewaltige Verbesserung der Rechenleistung moderner Computer enthebt die Quantenchemiker nicht der Aufgabe, immer bessere Algorithmen zur Lösung zu entwickeln, um damit der zunehmenden Komplexität der für die Chemie interessanten Probleme Herr zu werden. Ich möchte hier vor Allem das von Reinhart Ahlrichs und seinen Mitarbeitern entwickelte Programmsystem TURBOMOLE nennen, das die Quantenchemie besonders

nahe an die praktischen Anwendungen der Chemie herangeführt hat. Als sich in Göttingen die Emeritierung von Werner A. Bingel abzeichnete, gelang es Wilhelm Jost und Heinz Georg Wagner im Vorgriff auf Bingels Nachfolge eine der damaligen Fiebiger-Professuren zu akquirieren. Dieses war die Professur, die 1990 Peter Botschwina verliehen wurde. Nach der Emeritierung Bingels 1993 übernahm Botschwina dann die ordentliche Professur für Theoretische Chemie am Institut für Physikalische Chemie.

Peter Botschwina wurde 1948 in Göppingen geboren. Nach seiner Schulzeit und zwei Jahren Wehrdienst bei der Bundesluftwaffe konnte er 1969 in Stuttgart schließlich mit dem Chemiestudium beginnen. Dort traf er auch auf seinen späteren Doktorvater Wilfried Meyer, der wiederum über seinen aus dem Max-Planck-Institut für Astrophysik stammenden Doktorvater Heinzwerner Preuß mit den Anwendungen der Quantenchemie in der Astrospektroskopie vertraut war. Als Meyer zuerst nach Mainz und dann nach Kaiserslautern ging, folgte ihm Botschwina, wurde 1980 promoviert und habilitierte sich 1985. Von Wilfried Meyer übernahm Botschwina die Methoden zur genauen Berechnung der Strukturen und spektroskopischen Eigenschaften kleiner Moleküle unter Verwendung der CEPA-Methode. Obgleich Botschwina selbst kein Methodenentwickler im eigentlichen Sinne wurde, gelang es ihm, durch Einbeziehung von Anharmonizitätsbeiträgen molekularer Schwingungen die Lagen und Intensitäten von Rotations-Schwingungs-Übergängen auf das Genaueste zu charakterisieren. Damit verfügte er über das Rüstzeug, das für Anwendungen in der Radioastronomie benötigt wird. Es wurde hier schon einmal über die gewaltigen Radioteleskope berichtet, mit denen heute im Millimeter- und Mikrowellen-Spektralbereich eine unglaubliche Zahl von Absorptionslinien registriert werden. Wie kann man diese identifizieren? Indem man versucht, im Labor entsprechende Spezies herzustellen, deren Spektren zu messen und dann Linie für Linie zuzuordnen. Manchmal gelingt dies, aber meistens bleiben die Linien unidentifiziert. Man ist erheblich erfolgreicher, wenn man mit quantenmechanischen Methoden die Lage und Intensität der Spektrallinien vermuteter Teilchen vorhersagen kann und dadurch zu einer eindeutigen Zuordnung gelangt. Hier liegen die ganz herausragenden Leistungen Peter Botschwinas, und hier war er die weltweit führende Autorität. Er hat die Existenz vieler in interstellaren molekularen Wolken vorkommender Moleküle nachweisen können. Dazu gehören ganz besonders Moleküle mit langen Kohlenstoffketten, z. B. mit 11 oder 13 Kohlenstoffatomen, oft mit einem Wasserstoff- oder Stickstoffatom am Ende. Auch hat Botschwina deren Anionen, also negativ geladene Moleküle, identifiziert. Wie es zur Entstehung so großer Moleküle unter ansonsten wahrlich unwirtlichen Bedingungen im Weltraum und unter Beschuss mit kosmischer

Strahlung kommt, ist bis heute ein Rätsel. Aber dank Botschwinas Identifizierung ist man sich ihrer Anwesenheit absolut sicher, und man kann die Entstehungswege wenigstens vermuten. Auf Quantenchemiker vom Schlage Botschwinas wartet hier noch viel Arbeit: wohl die Hälfte der in der Radioastrochemie mit immensem finanziellem Aufwand aufgezeichneten Spektrallinien ist bisher nicht identifiziert. Wenigstens hat man in den letzten Jahren den Ursprung der rätselhaften diffusen interstellaren Spektren aufklären und zuordnen können. Aber das ist nur ein Anfang. Sind Biomoleküle bei den Spektren dabei? Eine nicht uninteressante Frage.

Ein weiteres Gebiet, auf dem Botschwina aktiv war, ist nicht weniger wichtig. In den 1960er Jahren war Freiburg eine Hochburg der Atom- und Molekülphysik, der Stoßprozesse von Atomen und Molekülen. Solche Vorgänge werden vollständig durch die Wechselwirkungskräfte bestimmt, und das ist wiederum ein Forschungsgegenstand der Quantenchemie. Von Freiburg aus wurde dieses Gebiet der inelastischen und reaktiven Stoßprozesse nach Kaiserslautern überführt, und es wird dort auch heute noch schwerpunktmäßig betrieben. Botschwinas Doktorvater Wilfried Meyer wurde naturgemäß in diese Aktivitäten einbezogen, als er von Mainz nach Kaiserslautern ging, und so interessierte sich auch Botschwina schon früh für dieses Gebiet. Dies machte ihn gerade für die Göttinger Physikalische Chemie mit ihrem Schwerpunkt in der Reaktionskinetik interessant. Botschwina war deshalb selbstverständlich Mitglied der Sonderforschungsbereiche „Photochemie mit Lasern“ und „Molekulare Mechanismen unimolekularer Prozesse“. Er stand dessen Mitgliedern viele Jahre mit Rat und Tat zur Seite. Er bearbeitete viele für die Chemie wichtige Phänomene. Dazu gehörten auch schwach gebundene Molekülcluster, Eigenschaften von Wasserstoffbrückenbindungen, Potentiale für die in der physikalisch-organischen Chemie beliebten  $S_N2$ -Reaktionen und vieles andere mehr.

Ein Bild der Persönlichkeit Peter Botschwinas wäre unvollständig ohne die Erwähnung seines Einsatzes für die Lehre, z. B. in der Quantenchemie und in der Mathematik für Chemiker. Er hat der Chemie in vielen Funktionen selbstlos und gewissenhaft gedient, als Dekan der Fakultät für Chemie und als mehrfacher Direktor des Instituts für physikalische Chemie sowie schließlich als Vorsitzender der Senatskommission für Forschung der Göttinger Universität. Last but not least war er 10 Jahre Vorsitzender des Ortsverbandes der Gesellschaft Deutscher Chemiker und hat über diese lange Zeit das regelmäßige Vortragsprogramm der Chemiker in eindrucksvoller Weise organisiert. Er fehlt uns allen sehr.